МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФГАОУ ВПО “КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ”

Р.М. ХУСНУТДИНОВ, А.В. МОКШИН

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

Учебно-методическое пособие

КАЗАНЬ – 2015

Печатается по решению учебно-методического совета
Института Физики
Казанского (Приволжского) федерального университета

УДК 539(075)
ББК 22.31я73
Х98

Научный редактор
д-р физ.-мат. наук, проф. **Д.А. Таюрский**

Рецензенты:
д-р. физ.-мат. наук, проф. (КФУ) **Л.А. Нефедьев**
канд. физ.-мат. наук, доц. (КФУ) **Ф.М. Гафаров**

Хуснутдинов Р.М., Мокшин А.В. Физика твердого тела. Учебно-методическое пособие. – Казань: К(П)ФУ, 2015. – 31 с.

ISBN 978-5-87730-482-6

В данном учебно-методическом пособии представлены задачи по курсу “Физика твердого тела”, основные положения и формулы, необходимые для решения задач, а также примеры с решениями типичных задач.

ISBN 978-5-87730-482-6

Оглавление

Предисловие

Решение физических задач является необходимой практической основой изучения дисциплины “Физика твердого тела”. Основной целью практических занятий является выработка у студентов приемов и навыков решения задач из разных областей физики твердого тела. Практические занятия несут в себе функцию закрепления, развития и углубленного освоения основных положений теории. Решение задач способствует приобщению студентов к самостоятельной творческой работе. При решении задач студент должен самостоятельно осуществлять ряд мыслительных операций, опираясь на имеющиеся у него знания и умения. Практические занятия позволяют проверить степень усвоения студентами основных разделов теоретического курса.

В данном учебном пособии рассмотрены основные разделы курса “Физика твердого тела”, такие как, пространственная решетка кристаллов, энергия связи кристаллов, динамика кристаллической решетки и теплоемкость кристаллов, электронный газ в металлах. Каждый раздел включает необходимые теоретические сведения, основные понятия и определения, представлены примеры решения типовых задач и задания для самостоятельной работы.

§1. Пространственная решетка кристалла

1. Координаты любого узла решетки записываются в виде:

$$X = n_1 a_1, \qquad Y = n_2 a_2, \qquad Z = n_3 a_3$$

и обозначаются: $[n_1 n_2 n_3]$, где a_i – основные периоды решетки ($i = 1, 2, 3$), n_i – целые числа, называемые ***индексами узла*** и обозначающие число периодов решетки, соответствующие данному узлу.

2. Для описания направления в кристалле выбирают прямую, проходящую через начало координат. Ее направление однозначно определяется ***индексами направления***, $[n_1 n_2 n_3]$, где n_i – индексы ближайшего к началу координат узла решетки.

3. ***Период идентичности*** вдоль прямой, заданной индексами $[n_1 n_2 n_3]$, в кубической решетке выражается соотношением:

$$I = a\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2} \tag{1}$$

где a – параметр решетки. Под периодом идентичности подразумевается расстояние между ближайшими идентичными узлами, лежащими на одной прямой.

4. *Кристаллографические плоскости* определяются тремя взаимно простыми целыми числами (hkl), называемые ***индексами Миллера***. Они определяют систему бесконечного числа параллельных между собой плоскостей, каждая из которых характеризуется определенным значением $q = 0, \pm 1, \pm 2, ...$. Таким образом, кристаллографическая плоскость однозначно задается совокупностью чисел $\{(hkl), q\}$. Для отрицательных индексов над (или под) буквой ставится знак “минус”, например $(\overline{h}kl)$ [или $(\underline{h}kl)$]. Индексы $[n_1 n_2 n_3]$ любого узла, лежащего в данной плоскости, удовлетворяют соотношению:

$$n_1 h + n_2 k + n_3 l = q \tag{2}$$

При $q = 0$ плоскость проходит через начало координат. Если плоскость параллельна какой-либо оси координат, то соответствующий индекс Миллера равен нулю. Так, плоскость (110) параллельна оси z, а плоскость (100) параллельна плоскости yz

5. Расстояние d плоскости от начала координат определяется числом q:
$$d = \frac{q}{b_0}, \tag{3}$$
где
$$\mathbf{b}_0 = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3 \tag{4}$$
вектор обратной решетки, $\mathbf{b}_i$ $(i = 1, 2, 3)$ – базисные векторы обратной решетки,
$$\mathbf{b}_1 = \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]}{V_0}, \qquad \mathbf{b}_2 = \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1]}{V_0}, \qquad \mathbf{b}_3 = \frac{[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]}{V_0}, \tag{5}$$
V_0 – объем элементарной ячейки кристалла.

Из формулы (3) следует, что расстояние d между соседними плоскостями $(\Delta q = 0)$ с индексами (hkl) равно:
$$d = \frac{1}{\sqrt{h^2 b_1^2 + k^2 b_2^2 + l^2 b_3^2}}. \tag{6}$$

6. Кристаллические плоскости отсекают на осях координат отрезки, равные:
$$x_q = \frac{a_1 q}{h}, \qquad y_q = \frac{a_2 q}{k}, \qquad z_q = \frac{a_3 q}{l}, \tag{7}$$
Очевидно, что если q/h, q/k или q/l целые числа, то плоскость пересекает соответствующую координатную ось в узловой точке.

7. ***Молярный объем кристалла***:
$$V_\mu = \frac{\mu}{\rho}. \tag{8}$$
Здесь μ – молярная масса, ρ – плотность кристалла.

8. ***Объем элементарной ячейки*** в случае кубической сингонии:
$$V_0 = a^3, \tag{9}$$
где a – параметр решетки.

9. ***Координационное число*** N – количество ближайших соседей для каждого атома (иона).

10. ***Атомный радиус*** r_a, определяемый 1/2 расстояния между ближайшими соседями.

11. ***Степень упаковки*** f, равная отношению объема, занятого атомами (как твердыми шарами) в элементарной ячейке, к ее объему.

Пример 1. Определить параметр решетки и плотность кристалла кальция, если расстояние между ближайшими соседними атомами равно 0.393 нм. Решетка кубическая, гранецентрированная.

Решение: Параметр решетки (a) и расстояние между двумя ближайшими соседними атомами (d) в кубической гранецентрированной решетке связаны соотношением:
$$a = d\sqrt{2}.$$
Подставляя в это выражение численные значения, получим:
$$a = 0.393 \cdot 10^{-9} \cdot \sqrt{2} = 5.56 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$
Плотность кристалла можно выразить следующим соотношением:
$$\rho = \frac{\mu}{N_A}\frac{z}{a^3} = \frac{40 \cdot 10^{-3}}{6.02 \cdot 10^{23}}\frac{4}{(5.56 \cdot 10^{-10})^3} = 1.55 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3.$$
Здесь $\mu = 40 \cdot 10^{-3}$ кг/моль – молярная масса кальция, $z = 4$ – число атомов в элементарном кубе (ГЦК).

Ответ: $a = 5.56 \cdot 10^{-10}$ м, $\rho = 1.55 \cdot 10^3$ кг/м^3.

Пример 2. Вычислить период идентичности I вдоль прямой [231] в решетке $NaCl$, если плотность кристалла $\rho = 2.17$ г/см^3. Решетка гранецентрированная кубическая.

Решение: Постоянная решетки кристалла $NaCl$ определяется соотношением:

$$a = \left(\frac{\mu z}{\rho N_A}\right)^{1/3}.$$

Для гранецентрированной решетки число ионов в элементарной ячейке $z = 4$. Пользуясь периодической таблицей Менделеева, находим: $A_r(Na) = 23$, $A_r(Cl) = 35$. Следовательно, $M_r(NaCl) = A_r(Na) + A_r(Cl) = 58$, откуда $\mu(NaCl) = 58 \cdot 10^{-3}$ кг/моль. Подставляя числовые значения в предыдущую формулу, получим $a = 5.62 \cdot 10^{-10}$ м. Период идентичности кристалла вдоль прямой [231]:

$$I = a\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2} = 5.62 \cdot 10^{-10}\sqrt{4+9+1} = 13.3 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

Ответ: $I = 1.33$ нм.

Пример 3. Написать индексы Миллера для плоскости, проходящей через узлы с индексами: [010], $[12\underline{2}]$, [132]. Найти отрезки, отсекаемые этими плоскостями на осях координат.

Решение: Для любого узла с индексами $[n_1 n_2 n_3]$, лежащего в данной плоскости, индексы Миллера (hkl) удовлетворяют соотношению:

$$n_1 h + n_2 k + n_3 l = q,$$

где h, k, l, q – целые числа. Подставляя в данное уравнение последовательно индексы всех трех узлов, получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} k = q, \\ h + 2k - 2l = q, \\ h + 3k + 2l = q. \end{cases}$$

Решая эту систему в целых числах, получаем $h = -6$, $k = 4$, $l = -1$; $q = 4$, т.е. данная плоскость задается индексами $\{(\underline{6}4\underline{1}); 4\}$. Она отсекает на осях координат отрезки, равные:

$$\begin{cases} x_0 = a_1 q/h = -\dfrac{2}{3}a_1, \\ y_0 = a_2 q/k = a_2, \\ z_0 = a_3 q/l = -4a_3. \end{cases}$$

Здесь a_i – основные периоды решетки (где $i = 1, 2, 3$).

Ответ: $\{(\underline{6}4\underline{1}); 4\}$, $\{-2/3a_1, a_2, -4a_3\}$.

Задачи

1. Рассчитать, сколько атомов приходится на одну элементарную ячейку в кристаллах с:
   а) гранецентрированной кубической решеткой;
   б) объемноцентрированной кубической решеткой.

2. Вычислить степень упаковки атомов в кристаллах, имеющих:
   а) простую кубическую структуру;
   б) ОЦК структуру;
   в) ГЦК структуру.

3. Произведя соответствующие вычисления, заполнить таблицу:

Характеристики решетки	**Простая кубическая**	**ОЦК**	**ГЦК**
Атомный радиус Число атомов в элементарном кубе Степень упаковки Координационное число			

4. Плотность меди, имеющей ГЦК решетку, равна $8.96 \cdot 10^3$ кг/м^3. Вычислить объем элементарной ячейки и атомный радиус для этой кристаллической структуры. Сколько атомов содержится в объеме, равном 1 м^3?

5. Принимая во внимание ГЦК структуру у золота, вычислить постоянную решетки, атомный радиус и число атомов в объеме, равном 1 м^3. Плотность золота равна $1.932 \cdot 10^4$ кг/м^3.

6. По табличным значениям молярной массы и плотности определить постоянную кристаллической решетки молибдена, имеющего ОЦК структуру.

7. α-железо при температуре ниже 910°С имеет ОЦК структуру ($a = 2.86 \cdot 10^{-10}$ м). При нагревании свыше 910°С α-железо переходит в γ-модификацию, приобретая ГЦК структуру ($a = 3.56 \cdot 10^{-10}$ м). Как изменится плотность железа в указанном превращении?

8. Определить индексы Миллера для:
   а) плоскости, отсекающей на осях кубической решетки отрезки $A = a$, $B = 0.5a$, $C = 1.5a$, где a – постоянная решетки;
   б) диагоналей кубической решетки.

9. Определить отрезки, отсекаемые на осях кубической решетки плоскостью (123). Изобразить эту плоскость и направления [001], [100], [110]. *Ответ:* a; $0.5a$; $1/3a$.

10. Доказать, что расстояние d между двумя соседними плоскостями типа (hkl) в кубической решетке с ребром a определяется соотношением:
$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}.$$

11. Зная постоянную кубической решетки, вычислить расстояния между кристаллографическими плоскостями d_{100}, d_{110}, d_{111} для:
    а) простой кубической структуры;
    б) ОЦК структуры;
    в) ГЦК структуры.

12. Для пучка рентгеновских лучей с длиной волны $1.537 \cdot 10^{-10}$ м, падающего на кристалл алюминия, наблюдается брэгговское отражение первого порядка от плоскостей (111) под углом скольжения $19°20'$. Определить по этим экспериментальным данным постоянную Авогадро, если известно, что алюминий имеет ГЦК структуру, плотность 2700 кг/м^3 и молярную массу 0.02698 кг/моль.

§2. Энергия связи кристаллов

1. ***Энергия ионных кристаллов***, отнесенная к паре разноименных ионов, выражается формулой

$$U(r) = -\frac{\alpha q^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{\beta}{r^n}. \qquad (1)$$

Здесь q – заряд иона, α – постоянная Маделунга, r – расстояние между ближайшими ионами, β, n – постоянные. Первое слагаемое в (1) представляет энергию кулоновского межионного взаимодействия, второе – энергию короткодействующих сил отталкивания, обусловленных перекрытием электронных оболочек соседних атомов.

2. В ***молекулярных кристаллах*** в узлах решетки находятся молекулы или нейтральные атомы. Между атомами возникает слабое флуктуационно-дипольное притяжение (силы Ван-дер-Ваальса), при этом потенциальная энергия равна:

$$U(r) = -\frac{const}{r^6}. \qquad (2)$$

3. В ***металлических кристаллах*** связь обусловлена взаимодействием положительно заряженных ионов и электронов проводимости. В простейшей модели ионы рассматриваются как точечные заряды, локализованные в узлах решетки, а электроны проводимости – как постоянный однородный фон отрицательного заряда. В этом случае энергия щелочного металла в расчете на один атом представляется выражением:

$$U(r_s) = -\frac{9e^2}{40\pi\varepsilon_0 r_s} + \frac{3\hbar^2}{10mr_s^2}\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}. \qquad (3)$$

Здесь m – заряд и масса электрона, r_s – радиус сферы Вигнера-Зейтца, т. е. радиус сферической области, содержащей один электрон (в центре сферы расположен точечный ион), $\hbar$ – постоянная Планка.

4. Для ***ковалентной связи*** энергия взаимодействия имеет вид:

$$U(r) = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r^4} + C\exp(-\alpha r), \tag{4}$$

где C, α – постоянные.

Значения основных физических постоянных ионных кристаллов

Кристалл	Постоянная решетки, a (10^{-10} м)	Постоянная Маделунга, α	Энергия связи (КДж/моль)
NaCl	5.64	1.748	765
KCl	6.29	1.748	691
CsCl	4.12	1.763	627

Пример 1. Получить выражение для полной энергии ионных кристаллов.

Решение: Полная энергия взаимодействия кристалла с разноименными ионами определяется выражением:

$$U(r) = NU_i = -N\left(\frac{\alpha q^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - \frac{\beta}{r^n}\right). \tag{5}$$

Исключим из уравнения константу β учитывая, что в равновесном состоянии полная энергия кристалла должна быть минимальной:

$$\left.\frac{dU(r)}{dr}\right|_{r=r_0} = 0, \tag{6}$$

которая равняется

$$\beta = \frac{\alpha q^2 r_0^{n-1}}{4\pi\varepsilon_0 n} \tag{7}$$

окончательно получим

$$U(r) = -N\frac{\alpha q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\left[1 - \frac{1}{n}\left(\frac{r_0}{r}\right)^{n-1}\right]. \tag{8}$$

Величина $\left(-N\dfrac{\alpha q^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\right)$ называется *энергией Маделунга.*

Ответ: $U(r) = -N\dfrac{\alpha q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\left[1 - \dfrac{1}{n}\left(\dfrac{r_0}{r}\right)^{n-1}\right].$

Пример 2. Вычислить постоянную Маделунга для линейной бесконечной цепочки ионов, чередующихся по знаку электрического заряда ($\pm e$).

Решение: Выберем отрицательный ион за исходный, а через r_0 обозначим расстояние между соседними ионами. Удобно представить постоянную Маделунга в эквивалентной форме:

$$\frac{\alpha}{r_0} = \sum_{j, j\neq i} \frac{\pm 1}{r_j}, \tag{9}$$

где r_j – расстояние иона с номером j от исходного. Расписывая сумму, получим

$$\frac{\alpha}{r_0} = 2\left[\frac{1}{r_0} - \frac{1}{2r_0} + \frac{1}{3r_0} - \frac{1}{4r_0} + \ldots\right], \tag{10}$$

или

$$\alpha = 2\left[1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \ldots\right]. \tag{11}$$

Множитель 2 появляется потому, что на каждом данном расстоянии r_j имеются два иона одинакового знака – справа и слева. Воспользуемся формулой разложения в ряд:

$$\ln(1+x) = \left[x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \ldots\right]. \tag{12}$$

Следовательно, для одномерной цепочки постоянная Маделунга равна $2\ln 2$.

Ответ: $\alpha = 2\ln 2$.

Задачи

1. Найти полную энергию в равновесном состоянии одномерного ионного кристалла, состоящего из $2N$ чередующихся по знаку заряда ($\pm e$) ионов. Считать потенциальную энергию отталкивания для ближайших соседей пропорциональной $1/r^n$, где $n \gg 1$. Равновесное расстояние между соседними ионами равно a_0.

2. Вычислить постоянную Маделунга для двумерной решетки $NaCl$. Суммирование провести для последовательности атомных слоев, каждый из которых включает в себя электронейтральную группу атомов (метод Эвьена). При подсчете учесть атомы трех электронейтральных групп.

3. Вычислить постоянную Маделунга для структуры хлорида натрия $NaCl$.
Указание. Воспользовавшись методом Эвьена, провести расчет по двум электронейтральным группам ионов.

4. Используя выражение для энергии ионного кристалла (1), показать, что молярная энергия связи, соответствующая равновесному кратчайшему расстоянию между ионами $r = r_0$, выражается в виде
$$E = N_A \frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\left(1 - \frac{1}{n}\right),$$
где N_A – постоянная Авогадро.

5. Зная постоянную решетки a, константу Маделунга α и молярную энергию связи в равновесном состоянии, оценить значение показателя степени n в формуле (1) для энергии ионных кристаллов: 1) $NaCl$, 2) KCl. *Указание*: $r_0 = a/2$.

6. Как изменится равновесное расстояние r_0 между ближайшими ионами и энергия связи решетки $NaCl$, если заряд каждого иона возрастет вдвое?

7. Энергию ионных кристаллов, отнесенную к одной паре разноименных ионов, можно представить выражением
$$U(r) = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + A\exp\left(-r/\rho\right),$$
где A, α, ρ – const. Найти выражение для молярной энергии связи E_c ионного кристалла в равновесном состоянии и вывести формулу для определения ρ.

8. На основе выражения для энергии одновалентных металлов оценить постоянную решетки кристаллического натрия. Связь

постоянной решетки с равновесным расстоянием для объемно-центрированной решетки $4\pi r_0^3/3 = a^3/2$.

§3. Динамика кристаллической решетки. Теплоемкость кристаллов

1. Согласно ***закону Дюлонга и Пти***, молярная теплоемкость химически простых твердых тел при температурах больших *температуры Дебая* Θ_D равна:

$$C_\mu = 3R, \tag{1}$$

где R = 8.31 Дж/(моль·К) – универсальная газовая постоянная. Для химически сложных тел (состоящих из атомов различных химических элементов) – ***закону Неймана-Коппа***

$$C_\mu = 3nR, \tag{2}$$

где n – общее число частиц в химической формуле соединения.

2. ***Удельная теплоемкость***:

$$c = \frac{C_\mu}{\mu} \tag{3}$$

для химически простых и

$$c = \frac{3nR}{\sum \mu_i} \tag{4}$$

для химически сложных веществ.

3. ***Энергия*** ε и ***квазиимпульс фонона*** p связаны с циклической частотой колебаний ω и длиной волны λ соотношениями:

$$\varepsilon = \hbar\omega, \qquad p = \frac{h}{\lambda}. \tag{5}$$

4. ***Частота Дебая*** (максимальная частота колебаний кристаллической решетки) определяется соотношением:

$$\omega_D = \vartheta(6\pi^2 n)^{1/3}. \tag{6}$$

Здесь $n = N/V = N_A\rho/\mu$ – концентрация атомов в кристалле, ρ – плотность кристалла, μ – масса одного моля вещества.

5. ***Температура Дебая***:

$$\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}. \tag{7}$$

6. ***Молярная теплоемкость кристаллической решетки*** при температуре $T \ll \Theta_D$:

$$C_\mu = \frac{12}{5}\pi^4 R\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3. \tag{8}$$

7. ***Средняя энергия тепловых колебаний кристаллической решетки в расчете*** на 1 моль в *приближении теории Дебая* как функция температуры описывается выражением:

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{9}{8}R\Theta_D\left[1 + 8\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^4 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^3dx}{e^x - 1}\right]. \tag{9}$$

Пример 1. Вычислить по классической теории теплоемкость C кристалла бромида алюминия ($AlBr_3$) объемом $V = 200$ см^3. Плотность кристалла бромида алюминия $\rho = 3.01$ г/см^3. Условие $T > \Theta_D$ считать выполненным.

Решение: Химическая формула соединения $AlBr_3$ содержит четыре атома ($n = 4$). Поэтому, согласно закону Неймана-Коппа, молярная теплоемкость кристалла

$$C_\mu = 3nR, \tag{10}$$

Теплоемкость всего кристалла:

$$C = \frac{C_\mu}{\mu} = \frac{C_\mu\rho V}{\mu} = \frac{12R\rho V}{\Big(A_r(Al) + 3A_r(Br)\Big)\cdot 10^{-3}}, \tag{11}$$

Ответ: $C = 225$ Дж/К.

Пример 2. Вычислить длину волны фононов в свинце, соответствующую частоте $\omega = 0.1 \cdot \omega_D$, если плотность свинца $\rho = 11.3$ г/см^3, а молярная масса $\mu = 207$ г/моль.

Решение: Частота Дебая (максимальная частота колебаний кристаллической решетки) определяется выражением:

$$\omega_D = \vartheta(6\pi^2 n)^{1/3},$$

где ϑ – скорость распространения колебаний (скорость звука) в кристалле, n – концентрация атомов в кристалле:

$$n = N_A \rho / \mu.$$

В пренебрежении дисперсии звука в кристалле:

$$\lambda_F = 2\pi\vartheta/\omega, \qquad \left(\vartheta = E/p = \frac{\omega\lambda}{2\pi}\right)$$

или, согласно условию задачи

$$\lambda_F = 20\pi\vartheta/\omega_D.$$

Пользуясь формулой для частоты Дебая, получаем выражение для длины волны фонона:

$$\lambda_F = \frac{20\pi}{(6\pi^2 N_A \rho/\mu)^{1/3}}.$$

Ответ: $\lambda_F = 5$ нм.

Пример 3. Определить температуру Дебая для серебра, если известно, что для нагревания серебра массой $m = 15$ г от температуры $T_1 = 5$ K до температуры $T_2 = 10$ K надо затратить количество тепла $Q = 6.8 \cdot 10^{-2}$ Дж. Условие $T \ll \Theta_D$ считать выполненным.

Решение: Так как по условию задачи $T \ll \Theta_D$, то можно воспользоваться формулой Дебая:

$$C_\mu = \frac{12}{5}\pi^4 R \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3. \qquad (12)$$

Теплоемкость C тела связана с молярной теплоемкостью соотношением:

$$C = \frac{C_\mu m}{\mu} \qquad (13)$$

Подставляя данное уравнение в предыдущее и интегрируя по температуре от T_1 до T_2, получаем:

$$Q = \frac{3\pi^4 m R}{5\mu\Theta_D^3}\left(T_2^4 - T_1^4\right). \qquad (14)$$

Из которого получаем выражение для температуры Дебая

$$\Theta_D = \left(\frac{3\pi^4 mR}{5\mu Q} \left[T_2^4 - T_1^4 \right] \right)^{1/3}. \tag{15}$$

Ответ: $\Theta_D = 210$ К.

Задачи

1. Пользуясь классической теорией, вычислить удельные теплоемкости c кристаллов каменной соли и флюорита (KCl и CaF_2). Относительные атомные массы: $A_r(K) = 39.0$, $A_r(Cl) = 35.0$, $A_r(Ca) = 40.0$, $A_r(F) = 19.0$.

2. Вычислить по классической теории теплоемкость кристалла $NaCl$ объемом $V = 100$ см^3. Плотность кристалла $\rho = 2.2$ г/см^3.

3. Определить изменение внутренней энергии кристалла корунда (Al_2O_3) при нагревании от $T_1 = 30$°C до $T_2 = 150$°C. Масса кристалла $m = 30$ г. Относительные атомные массы: $A_r(Al) = 27.0$, $A_r(O) = 16.0$. Условие $T > \Theta_D$ считать выполненным.

4. Вычислить частоту Дебая в кристалле золота. Температура Дебая для золота равна 180 К.

5. Медный образец массой 50 г находится при температуре $T_1 = 10$ К. Определить количество теплоты, необходимое для его нагревания до температуры $T_2 = 15$ К. Температуру Дебая для меди принять равной 300 К. Условие $T \ll \Theta_D$ считать выполненным. Относительная атомная масса меди равна $A_r(Cu) = 64.0$.

6. Вычислить по теории Дебая теплоемкость цинка массой 80 г при температуре $T = 12$ К. Температура Дебая для цинка равна 308 К. Относительная атомная масса цинка равна $A_r(Zn) = 65.0$.

7. Получить дифференциальное уравнение малых колебаний для неограниченной решетки из одинаковых атомов массой M, используя упрощенную модель, в которой все атомы смещаются лишь вдоль оси y.

8. Используя модель кристаллической решетки, описанную в предыдущей задаче, получить для нее закон дисперсии, т.е. функциональную связь между циклической частотой ω и волновым вектором $\mathbf{k}$.

9. Используя закон дисперсии, приведенный в предыдущей задаче, определить групповую скорость упругих волн для одномерной решетки из одинаковых атомов, расстояние между которыми в равновесном состоянии равно a.

10. Для линейной цепочки, состоящей из чередующихся атомов массами m_1 и m_2, получить и проанализировать закон дисперсии для нормальных мод, учитывая взаимодействие между ближайшими соседями. Упругую константу считать одинаковой и равной β. Построить график зависимости $\omega(k)$ для оптической и акустической ветвей.

11. Предполагая, что скорости распространения продольных ϑ_l и поперечных ϑ_t колебаний не зависят от частоты и направления волнового вектора, найти число акустических фононов в интервале частот $[\omega, \omega+d\omega]$ и температуру Дебая для пространственной решетки, состоящей из N одинаковых атомов.

12. Учитывая результат предыдущей задачи, получить через температуру Дебая число акустических фононов для решетки, состоящей из N атомов с частотой в заданном интервале $[\omega, \omega + d\omega]$, и определить наивероятнейшие значения частоты и энергии фонона при температуре, равной $\Theta_D/4$. При какой температуре наивероятнейшие значения энергии и частоты равны их максимальным значениям?

13. Оценить скорость акустических волн в кристалле натрия, если известно, что температура Дебая и плотность массы равны соответственно $\Theta_D = 160$ K, $\rho = 0.97$ г/см^3.

14. Оценить максимальные значения энергии и квазиимпульса фонона алюминия, если температура Дебая 374 K, плотность 2700 кг/м^3, молярная масса 0.02698 кг/моль. Алюминий имеет ГЦК решетку.

15. Найти зависимость полного числа фононов в кристалле, состоящем из N атомов, от температуры. Рассмотреть предельные случаи, когда $T \gg \Theta_D$, $T \ll \Theta_D$.

16. Полагая, что скорости распространения поперечных и продольных колебаний не зависят от частоты, одинаковы и равны ϑ, найти для двумерного кристалла – квадратной решетки, содержащей N одинаковых атомов, площадью S число колебаний в интервале частот $[\omega, \omega + d\omega]$ и характеристическую температуру Дебая.

17. Оценить температуру Дебая для двумерного кристалла, содержащего 10^{14} атом/см^2, считая скорость тепловых колебаний 10^6 см/с.

18. Оценить приближенно скорость звука в алмазе, зная, что температура Дебая 1860 K, решетка кубическая с постоянной $a = 1.54 \cdot 10^{-10}$м.

19. Найти выражение внутренней энергии кристаллической решетки в зависимости от температуры с учетом энергии нулевых колебаний. Рассмотреть предельные случаи $T \gg \Theta_D$, $T \ll \Theta_D$.

§4. Электронный газ в металлах

1. ***Равновесная функция распределения электронов*** с заданной проекцией спина представляет собой функцию распределения Ферми-Дирака:

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\dfrac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T}\right) + 1}, \tag{1}$$

   где

$$\varepsilon_F(T) = \varepsilon_F(0)\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F(0)}\right)^2\right] \tag{2}$$

   – *энергия Ферми.*

2. ***Энергия Ферми***. При температуре равной абсолютному нулю, энергия Ферми равна:

$$\varepsilon_F = \varepsilon_F(T=0) = \frac{p_F^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3}, \qquad n = \frac{N}{V}. \tag{3}$$

   Здесь m^* и p_F – эффективная масса электрона и импульс Ферми. Максимально возможные значения импульса p и соответствующей ему энергии ε электронов при $T = 0$ называются, соответственно, *импульсом* и *энергии Ферми.* Изоэнергетическая ($\varepsilon = \varepsilon_F = const$) поверхность (или совокупность поверхностей) в пространстве импульсов, внутри которой все состояния заполнены при $T = 0$ K называется *поверхностью Ферми.*

3. ***Средняя кинетическая энергия электронов*** определяется

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{3\varepsilon_F}{5}. \tag{4}$$

4. ***Температура Ферми*** и ***температура вырождения*** Температура вырождения – температура, ниже которой в газах появляются квантовые эффекты.

$$T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B}, \qquad T_d = \frac{4}{(9\pi)^{1/3}} T_F. \tag{5}$$

Пример 1. Вычислить максимальную энергию (энергию Ферми), которую могут иметь свободные электроны в металле (меди) при абсолютном нуле. Принять, что на каждый атом меди приходиться по одному свободному электрону. Плотность меди 8.9 г/см^3, молярная масса 64 г/моль.

Решение: Запишем формулу для определения энергии Ферми при абсолютном нуле:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3}. \tag{6}$$

Так как, на один атом меди приходиться по одному свободному электрону, то концентрация свободных электронов будет равно концентрации атомов в кристалле.

$$n = \rho N_A/\mu. \tag{7}$$

Подставляя данное выражение в формулу для энергии Ферми и учитывая, что эффективная масса электрона равняется массе электрона, получим:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(3\pi^2 \rho N_A/\mu\right)^{2/3} = 6.93 \text{ эВ}. \tag{8}$$

Ответ: $C = 6.93$ эВ.

Пример 2. Определить число свободных электронов, которое приходиться на один атом натрия при $T = 0$ K. Энергия Ферми $\varepsilon_F = 3.12$ эВ. Плотность кристалла 970 кг/м^3.

Решение: Из выражения для энергии Ферми определим концентрацию свободных электронов в кристалле

$$n = \frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{2m^*\varepsilon_F}{\hbar^2}\right)^{3/2}. \tag{9}$$

Зная плотность и молекулярную массу натрия найдем концентрацию атомов в кристалле:

$$n_{at} = \rho N_A/\mu. \tag{10}$$

Беря отношение концентрации свободных электронов в кристалле к общему числу атомов найдем количество электронов приходящиеся к одному атому:

$$N = \frac{n}{n_{at}} = \frac{\mu}{3\pi^2 \rho N_A} \left(\frac{2m^* \varepsilon_F}{\hbar^2} \right)^{3/2} = 0.9952 \approx 1. \tag{11}$$

Таким образом, на один атом натрия приходиться один свободный электрон. ***Ответ:*** $N = 1$.

Пример 3. Рассчитать значение энергии Ферми и температуры вырождения гелия ^{3}He в жидком состоянии и в газообразном состоянии при атмосферном давлении при температуре $T = 300$ K. Плотность жидкого гелия принять равной 0.081 г/см^3.

Решение: Используя уравнение состояния идеального газа $p = nk_BT$ для определения концентрации *газообразного гелия* и зависимость энергии Ферми от концентрации, получим

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(3\pi^2 \frac{p}{k_B T} \right)^{2/3} = 8 \cdot 10^{-25} \text{ Дж}. \tag{12}$$

Определим температуру вырождения

$$T_d = \frac{4}{(9\pi)^{1/3}} \frac{\varepsilon_F}{k_B} = 7.9 \cdot 10^{-2} \text{ K}. \tag{13}$$

Столь низкая температура вырождения гелия означает, что гелий при комнатных условиях является чисто классическим газом, подчиняющимся распределению Максвелла-Больцмана.

Для *жидкого гелия*, концентрация которого равна $n = \rho / m_{He} = 1.62 \cdot 10^{26}$ м$^{-3}$ энергия Ферми имеет значение

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(3\pi^2 n \right)^{2/3} = 6 \cdot 10^{-23} \text{ Дж}, \tag{14}$$

а температура вырождения

$$T_d = \frac{4}{(9\pi)^{1/3}} \frac{\varepsilon_F}{k_B} = 5.25 \text{ K}. \tag{15}$$

Ответ: Для газообразного гелия энергия Ферми равна $\varepsilon_F = 8 \cdot 10^{-25}$ Дж, температура вырождения $T_d = 7.9 \cdot 10^{-2}$ K; для жидкого гелия $\varepsilon_F = 6 \cdot 10^{-23}$ Дж, $T_d = 5.25$ K.

Задачи

1. Энергия Ферми в некотором металле $\varepsilon_F = 3.5$ эВ. Рассчитать концентрацию свободных электронов в этом металле и среднюю кинетическую энергию при $T = 0$ К.

2. Температура вырождения в натрии $T_d = 3.6 \cdot 10^4$ К. Определить максимальную скорость электронов в этом металле и их среднюю кинетическую энергию при $T = 0$ К.

3. Концентрация свободных электронов в натрии $n_e = 2.5 \cdot 10^{28}$ м$^{-3}$. Оценить максимальную скорость электронов в этом металле при $T = 0$ К и температуру его вырождения.

4. Определить температуру вырождения T_d для калия, если считать, что на каждый атом приходится по одному свободному электрону. Плотность калия $\rho = 860$ кг/м^3.

5. Вычислить положение уровня Ферми относительно дна зоны проводимости в полупроводнике с концентрацией ионизированных доноров $N_d = 10^{23}$ м$^{-3}$. При температуре $T = 300$ К плотность состояний у дна зоны проводимости $N_c = 2.5 \cdot 10^{25}$ м$^{-3}$.

6. Предположим, что в зоне проводимости металла с простой кубической решеткой энергетический спектр электронов имеет вид $\varepsilon = \hbar^2 k^2/2m^*$, где m^* – эффективная масса. Найти зависимость плотности состояний $g(\varepsilon)$ от энергии. При какой энергии поверхность Ферми коснется границы зоны Бриллюэна?

7. Найти интервал (в электрон-вольтах) между соседними энергетическими уровнями электронов проводимости вблизи уровня Ферми при абсолютном нуле температуры для серебра, если объем металла $V = 1$ см^3, $m^* = m$ и на каждый атом приходится один свободный электрон.

8. Считая поверхность Ферми серебра сферой, вычислить:
   а) радиус сферы Ферми в k-пространстве;
   б) площадь поперечного сечения сферы Ферми;
   в)скорость электронов с энергией Ферми.
   Плотность и атомный вес серебра равны 10.5 г/см^3, $A_r(Ag) =$

107.87. Эффективную массу электрона принять равной массе свободного электрона.

9. Вычислить энергию Ферми электронов проводимости при абсолютном нуле температуры для натрия и лития, полагая, что эффективная масса электрона m^* в обоих случаях равна массе свободного электрона m.

10. Получить с помощью распределения Ферми выражение для максимальной кинетической энергии электронов проводимости в металле при абсолютном нуле температуры, если их концентрация равна n. Вычислить ε_{max} для золота, считая, что на каждый атом приходится один свободный электрон и $m^* = 1.2m$.

11. Найти суммарную кинетическую электронов проводимости золота объемом 1 см^3 при $T = 0$ К, считая справедливыми условия предыдущей задачи и плотность состояний $g(\varepsilon)$ пропорциональной $\varepsilon^{1/2}$ (ε – энергия электрона).

12. Вычислить температуру идеального газа, у которого средняя кинетическая энергия частиц равна средней кинетической энергии электронов серебра при абсолютном нуле температуры. Считать, что на каждый атом серебра приходится один свободный электрон и $m^* = m$.

13. Число электронов, вылетающих за секунду с единичной площади поверхности металла со скоростью $[\vartheta, \vartheta + d\vartheta]$ определяется выражением:

$$dn(\vartheta) = 2\pi \left(\frac{m}{h}\right)^3 \exp\left(-\frac{1}{k_B T}\left[\frac{m\vartheta^2}{2} + A\right]\right)\vartheta^3 d\vartheta,$$

A – работа выхода электрона из металла. Считать, что $A \gg k_B T$. Найти плотность тока насыщения термоэлектронной эмиссии (формулу Ричардсона) из металла, имеющего работу выхода A и нагретого до температуры T.

14. Вычислить силу тока термоэлектронной эмиссии от серебряной проволоки длиной 5 см и диаметром 2 мм, нагретой до температуры $T = 2000$ К.

15. С помощью формулы Ричардсона найти работу выхода металлического катода, если известно, что при нагревании его от $T_1 = 1500$ К до $T_2 = 2000$ К термоэлектронный ток увеличивается в 5000 раз.

16. Используя известные значения энергии Ферми для Na, $\varepsilon_F = 3.2$ эВ и удельной электропроводности вблизи абсолютного нуля $\sigma = 2.3 \cdot 10^7$ Ом$^{-1}$м$^{-1}$, оценить время релаксации электронов проводимости, если $m^* = m$.

17. Энергия Ферми калия $\varepsilon_F = 2.1$ эВ, а электропроводность при $T = 0$ К $\sigma = 1.6 \cdot 10^7$ Ом$^{-1}$м$^{-1}$. Рассчитать с помощью этих данных среднюю длину пробега Λ электронов проводимости, полагая $m^* = m$.

18. По медной проволоке с площадью сечения $S = 0.01$ см^2 проходит ток $I = 20$ А. Оценить скорость дрейфа электронов в электрическом поле и сравнить ее со скоростью Ферми при $T = 0$ К. Считать, что $m^* = m$.

19. В случае натрия электропроводность при $T = 300$ К равна $2.17 \cdot 10^7$ Ом$^{-1}$м$^{-1}$ и $m^* = 1.2m$. Вычислить:
   а) среднюю длину свободного пробега электрона при $T = 300$К;
   б) дрейфовую скорость в поле напряженностью 100 В/м;
   в) расстояние, на которое переместится электрон в нити накала лампы длиной 1 м, если к ней приложено переменное напряжение 110 В с частотой 60 Гц.

Ответы и указания

§1. Пространственная решетка кристалла

1. 4; 2.

2. 0.52; 0.68; 0.74.

4. $4.71 \cdot 10^{-29}$ м^3; $1.28 \cdot 10^{-10}$ м; $8.49 \cdot 10^{28}$ м$^{-3}$;

5. $4.08 \cdot 10^{-10}$ м; $1.44 \cdot 10^{-10}$ м; $5.91 \cdot 10^{28}$.

6. $3.15 \cdot 10^{-10}$ м.

7. Увеличиться в 1.038 раз.

8. (362); [111]; $[\overline{1}\overline{1}1]$; $[\overline{1}11]$; $[1\overline{1}1]$.

9. a; $0.5a$; $1/3a$.

11. а) $d_{100} = a$; $d_{110} = a/\sqrt{2}$; $d_{111} = a/\sqrt{3}$.
б) $d_{100} = a/2$; $d_{110} = a/\sqrt{2}$; $d_{111} = a/2\sqrt{3}$.
в) $d_{100} = a/2$; $d_{110} = a/2\sqrt{2}$; $d_{111} = a/\sqrt{3}$.

§2. Энергия связи кристаллов

1. $U(a_0) = -N_A \dfrac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0}\left(1 - \dfrac{1}{n}\right)$.

2. $\alpha \approx 1.71$.

3. $\alpha \approx 1.752$.

4. $E = N_A \dfrac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\left(1 - \dfrac{1}{n}\right)$.

5. 9.04; 9.61.

6. Уменьшается в $4^{1/(n-1)}$ раз; возрастает в $4^{n/(n-1)}$ раз.

7. $E_b = N_0 \dfrac{\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\left(1 - \dfrac{\rho}{r_0}\right)$, $\rho = r_0\left(1 - \dfrac{4\pi\varepsilon_0 r_0 E_b}{N_0 \alpha e^2}\right)$.

8. $2.64 \cdot 10^{-10}$ м.

§3. Динамика кристаллической решетки. Теплоемкость кристаллов

1. 673.8 Дж/К, 958.8 Дж/К.

2. 187.5 Дж/К.

3. 4.40 кДж.

4. $23.65 \cdot 10^{13}$ Гц.

5. 0.571 Дж.

6. 0.141 Дж/К.

7. $M\dfrac{d^2U_n}{dt^2} = -\alpha\left(2U_n - U_{n-1} - U_{n+1}\right)$.

8. $\omega = \left|\omega_{max}\sin\left(\dfrac{ka}{2}\right)\right|$.

9. $\vartheta = a\omega_{max}\cos(ka/2)/2$.

11. $\dfrac{V\omega^2 d\omega}{2\pi^2}\left(\dfrac{1}{\vartheta_l^3} + \dfrac{2}{\vartheta_t^3}\right)$, $\theta = \dfrac{\hbar}{k_B}\left[\dfrac{18\pi^2 N}{V\left(1/\vartheta_l^3 + 2/\vartheta_t^3\right)}\right]^{1/3}$.

12. $9N\left(\dfrac{\hbar}{k_B\theta}\right)^3 \dfrac{\omega^2 d\omega}{\exp\left(\hbar\omega/k_BT\right) - 1}$, $\varepsilon_p = 1.6k_BT$, $\omega_p = 0.4k_B\theta$,

$T = 0.625\theta$.

13. 1837 м/с.

14. 0.032 эВ.

15. $n \sim T$, $n \sim T^3$.

16. $\dfrac{S\omega d\omega}{\vartheta^2\pi}$, $\dfrac{2\hbar\vartheta(\pi N/S)^{1/2}}{k_B}$.

17. 270К.

18. 4820 м/с.

19. $U_0 + 3Nk_BT$, $U_0 + \dfrac{3\pi^4}{5}Nk_BT\left(\dfrac{T}{\theta}\right)^3$, $U_0 = \dfrac{9}{8}Nk_B\theta$.

§4. Электронный газ в металлах

1. $3 \cdot 10^{28}$ м$^{-3}$, 1.5 эВ.
2. $1.2 \cdot 10^6$ м/с, 2.45 эВ.
3. $1.04 \cdot 10^6$ м/с, $4.71 \cdot 10^4$ К.
4. $T_d = 3.12 \cdot 10^4$ К.
5. $(\varepsilon_F - E_c) = -0.143$ эВ.
6. $g(\varepsilon)d\varepsilon = \dfrac{4\pi}{\hbar^3}\big(2m^*\big)^{3/2}d\varepsilon$, $h^2/8m^*a^2$.
7. $6.2 \cdot 10^{-23}$ эВ.
8. $1.2 \cdot 10^{10}$ м$^{-1}$, $4.5 \cdot 10^{20}$ м$^{-2}$, $1.49 \cdot 10^6$м/с.
9. 3.2 эВ, 4.7 эВ.
10. 4.6 эВ.
11. $2.6 \cdot 10^4$ Дж/см^3.
12. 25000 К.
13. $j = BT^2 \exp\big(-A/k_BT\big)$, $B = 4\pi e k^2 m/h^3$.
14. 0.02 А.
15. 4.1 эВ.
16. $3.16 \cdot 10^{-14}$ с.
17. $3.54 \cdot 10^{-8}$ м.
18. $1.5 \cdot 10^{-3}$ м/с, $v_F/v_d = 109$.
19. $2.7 \cdot 10^{-8}$ м, 0.44 м/с, 0.004 м.

Литература

[1] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель. - М.: Наука, 1978.

[2] Кацнельсон А.А. Введение в физику твердого тела / А.А. Кацнельсон. - М.: Изд-во МГУ, 1984.

[3] Ашкрофт Н. Физика твердого тела. Т. 1, 2. / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. - М.: Мир, 1979.

[4] Займан Дж. Принципы теории твердого тела / Дж. Займан. - М.: Мир, 1974.

[5] Уэрт Ч. Физика твердого тела / Ч. Уэрт, Р. Томсон. - М.: Мир, 1966.

[6] Давыдов А.С. Физика твердого тела / А.С. Давыдов. - М.: Мир, 1976.

[7] Ландау Л.Д. Статистическая физика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. - М.: Мир, 1976.

[8] Голдсмид Г.Дж. Задачи по физике твердого тела / Г.Дж. Голдсмид. - М.: Наука, 1976.

[9] Чертов А.Г. Задачник по физике / А.Г. Чертов, А.А. Воробьев. - М.: Высшая школа, 1988.

[10] Иродов И.Е. Сборник задач по атомной и ядерной физике / И.Е. Иродов. - М.: Энергоатомиздат, 1984.